

ВЛИЯНИЕ РАСТВОРИТЕЛЯ НА ФРАГМЕНТ СТРУКТУРЫ АЛЬБУМИНА

Люткин А.С., Петров А.С., Орлов В.Ю., Гаврилов Г.Б.

Ярославский государственный университет
150003, г. Ярославль, ул. Советская, д. 14

В настоящее время очень активно развиваются методы компьютерного моделирования биологических макромолекул. Ранее для расчета таких систем достаточно активно применялись методы молекулярной механики с оптимизацией структуры узловых фрагментов. На сегодняшний день использование аппарата современной квантовой химии позволяет проводить расчеты геометрии не только узловых молекул, но и целой системы, а также позволяет учитывать влияние различных факторов на пространственную и электронную структуры, динамику различных процессов (в том числе разделение, преобразование, взаимодействие с материалом и т.д.).

Нами было изучено влияние различного количества молекул растворителя (от 1 до 14), в качестве которого выступала вода, на фрагмент белка альбумина, состоящего из 10 аминокислотных последовательностей (GLU-VAL-GLN-LEU-LEU-GLU-SER-GLY-GLY-GLY). Исходная Z-матрица фрагмента белка была получена из банка данных 3D структур белков и нуклеиновых кислот (Protein Data Bank). Моделирование влияния растворителя проводилось в ряде программ – полуэмпирическим методом PM7 в Морас2016, неэмпирическим методом STO-2G в Firefly Gamess.

Было установлено, что для получения эффектов влияния среды достаточно наличие 4 молекул воды, находящихся во взаимодействии с фрагментом белка альбумина. В рамках квантово-химического моделирования была проведена оптимизация системы и рассчитаны термодинамические величины.

СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ МЕДИ (II) С 3-((E)-2- ГИДРОКСИБЕНЗИЛИДЕН)ГИДРОЗОНО)ИНДОЛИН-2-ОНОМ

Мамедова Ч.А., Алиева Ф.С., Шыхалиев Н.Г., Чырагов Ф.М.

Бакинский государственный университет
1148, г. Баку, ул. 3. Халилова, д. 23

На основе салицилового альдегида нами было синтезирован новый реагент : 3-((E)-2-гидроксibenзилиден)гидразоно)индолин-2-он.

Исследовано взаимодействие меди (II) с 3-((E)-2-гидроксибензилиден)гидрозоно)индолин-2-оном (R) в присутствии 4-аминоантипирина. Нами установлено, что этанольный раствор R при pH 4 имеет полосу поглощения с максимумом ($\lambda=275\text{nm}$). Установлено оптимальные условия комплексообразования бинарного комплекса: $\lambda=326\text{nm}$, при pH 4. Исследование полученного комплекса в присутствии 4-аминоантипирина показало, что под его влиянием образуется разнолигандный комплекс Cu (II)-R-4-аминоантипирин с максимальным светопоглощением 357 нм при pH 3 соответственно. Соотношение компонентов в составе установлены методами изомолярных серий, относительно выхода Старика-Барбанеля и сдвига равновесия. Все методы показали, что соотношение компонентов Cu(II)-R в бинарных комплексах равно 1:1, а в разнолигандном комплексе Cu(II)-R-4-аминоантипирин=1:2:1

Основные характеристики комплексов

Комплекс	pH _{опт}	$\lambda_{\text{так}}$, нм	ϵ	Соотношение компонентов	Интервал линейн.град. график мкг/мл
Cu-R	4	326	13000	1:1	0,256-1,536
Cu-R-4-аминоантипирин	3	357	28500	1:2:1	0,128-2,048

Молярные коэффициенты светопоглощения, интервал линейности градуированного графика для определения меди (II), а также другие аналитические характеристики реагентов даны в таблице. Изучено влияния посторонних ионов на определение Cu (II) в виде бинарных и разнолигандных компонентов.

ИМИНОЛАКТОН-ЛАКТАМНАЯ ПЕРЕГРУППИРОВКА В СИНТЕЗЕ ПИРРОЛО[3,4-С]ПИРИДИНОВ

Никифорова А.Л., Григорьев А.А., Каюков Я.С., Карпов С.В.

Чувашский государственный университет
428015, г. Чебоксары, Московский пр., д. 15

Пирроло[3,4-с]пиридины являются основным компонентом для веществ с биологической активностью. Среди них обнаружены вещества, являющиеся лигандами серотонинового 5-НТ₃ рецептора, ингибиторами каспазы 3 и обладающие антигельминтной активностью [1]. В